

На заключительном этапе работы технический фосфит (V) реакцией с тонкоизмельченной серой превращали в тиофосфат (VI). Соединение (VI) выделяли на колонке с силикагелем, элюент – бензол. Выход его достигал 50% в расчете на исходный ацеталь (III).

Индивидуальность, состав и строение полученных соединений доказывали методами тонкослойной хроматографии, элементного анализа, а также ЯМР ^{31}P - и ^1H -спектроскопии.

ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭТОКСИКАРБОНИЛЗАМЕЩЕННЫХ ЦИКЛОГЕКСАНОЛОНОВ С ПИПЕРИДИНОМ

Поплевина Н.В., Щелочкова О.А.

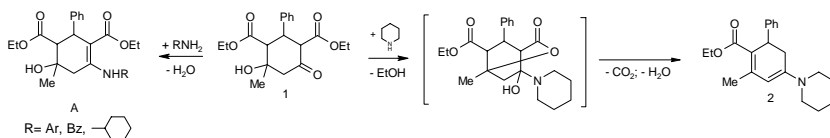
Саратовский государственный университет

Ранее нами был установлен общий характер реакций 2,4-диацетил(диалкокси-карбонил)-3-арил-5-гидрокси-5-метилциклогексанонов (β -циклокетолы) с аминами различных рядов (арил-, бензил-, циклогексиламины), протекающих региоселективно по карбонильной группе алицикла с образованием соответствующих циклогексенил-N-R-аминов. Среди последних найдены соединения с выраженным антифаговым и антиоксидантным действием.

В настоящей работе нами приведены новые данные по изучению взаимодействия β -циклокетолов (на примере 5-гидрокси-5-метил-3-фенил-2,4-диэтоксикарбонилциклогексанола **1**) с гетероциклическим амином (пиперидин). Установлено, что в условиях ариламинирования (кислотный катализатор, при соотношении амин : циклокетол = 1,2 : 1) и бензиламинирования (в отсутствие катализатора) реакция не имеет места. Реакция успешно протекала без катализатора при пятикратном избытке пиперидина. Однако вместо ожидаемого продукта нуклеофильного замещения карбонильной группы алицикла (**A**) был получен с выходом 54% продукт аминирования-дегидратации-декарбоксилирования – 2-метил-4-(1-пиперидил)-6-фенил-1,3-цикло-гексадиенил-карбоксилат **2**.

Состав и строение последнего установлены на основании данных элементного анализа, ИК-, ЯМР ^1H спектроскопии. Путь образования соединения **2** на основе полученных данных и литературного анализа можно представить через стадии аминирования, внутримолекулярной

циклолактонизации, обусловленной α,ϵ -цис-расположением гидроксильной и удаленной сложноэфирной групп; распад лактонного интермедиата (декарбоксилирование) и дегидратацию.



Таким образом, пиперидин выполняет роль нуклеофильного реагента и катализатора реакции дегидратации-декарбоксилирования.

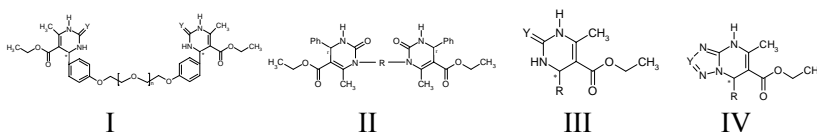
Полученные данные открывают путь перехода от доступных β -циклокетолов к полиядерным системам, содержащим фармакофорный пиперидиновый фрагмент.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТУБЕРКУЛОСТАТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ СОЕДИНЕНИЙ ДИГИДРОПИРИМИДИНОВОГО РЯДА

*Переяславская Е.С., Потемкин В.А., Гришина М.А., Жидовинова М.С.,
Федорова О.В., Русинов Г.Л.*

Челябинский государственный университет,
Институт органического синтеза УрО РАН, Екатеринбург

Осуществлено исследование туберкулостатической активности для выборки дигидропиримидинов:



Проведено комплексное исследование закономерностей влияния структурных характеристик дигидропиримидинов на туберкулостатическую активность. Выполнено моделирование взаимодействия лекарственных средств с дигидрофолатредуктазой (метод 3D-QSAR BiS [1]), и определены особенности связывания лигандов с рецептором.

Отмечено, что туберкулостатическая активность соединений пропорциональна увеличению электронодонорных свойств молекул (соединения выступают в роли акцепторов протонов). Конформация соединений с подандной цепью («молекулярная полость») обеспечивает возможность комплексообразования с катионами металлов, которые формируют донорно-акцепторные связи с гетероатомами колец.